

Title	化学反応と電子物性に関する理論的研究
Author(s)	笛野, 博之
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 (2018), 2017: 42-42
Issue Date	2018-03
URL	http://hdl.handle.net/2433/230742
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

化学反応と電子物性に関する理論的研究

Theoretical Studies of Chemical Reaction and Electronic Properties

京都大学大学院 工学研究科 分子工学専攻 量子機能化学講座 笛野 博之

研究成果概要

大環状構造を有する芳香族アミン化合物はイオン化ポテンシャルが小さく、発生したラジカルカチオンが安定であることが知られておる。下図のテトラアザ[14]m,p,m,p-シクロファン (TAC) のジカチオン種はスピン三重項状態が基底状態となる高スピン分子である。また、ホウ素原子を含む π 共役系分子は、ホウ素原子の p 軌道に起因した光物性を示すことが知られており、窒素原子とホウ素原子をフェニレンで架橋した分子では、電子アクセプターとして働くホウ素原子部位と電子ドナーとして働く窒素原子部位の組み合わせで分子内電荷移動遷移に基づく発光特性が発現する。本研究では TAC の結合様式を変えずに4個の窒素原子のうち2個をホウ素原子で置換した大環状分子 **1** 及び **2** を新規に合成し、ホウ素原子と窒素原子の骨格内における配置の違いが電子物性に与える影響を調べることを目的とした。

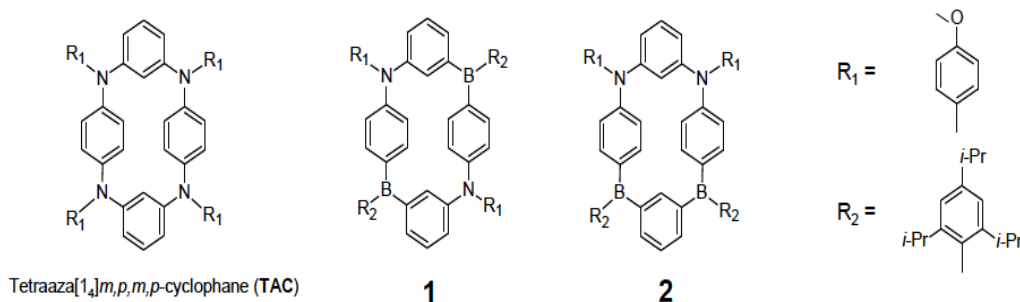


Figure 1. TAC, molecules **1** and **2**.

分子 **1**, **2** のイソプロピル基とメトキシ基をそれぞれ水素原子で置換したモデル分子 **1'**, **2'** について量子化学計算を行った。計算方法には B3LYP/6-31G*法を用い、Gaussian09 プログラムを使用した。**1'** の HOMO は主にトリフェニルアミン上、LUMO は主にホウ素原子上に存在する。また TD-DFT 計算の結果、400 ~ 450nm 付近に窒素原子周辺からホウ素原子周辺への分子内電荷移動遷移に基づく吸収がみられた。**2'** の HOMO は主にメタフェニレンジアミン上、LUMO は主にホウ素原子上に存在し、385, 424nm 付近に窒素原子周辺からホウ素原子周辺への分子内電荷移動遷移に基づく吸収がみられた。これらのことは分子**1**と**2**が溶液でも固体でも発光することに関連付けられる。

発表論文(謝辞あり)

A. Ito, M. Uebe, R. Kurata, S. Yano, H. Fueno T. Matsumoto, Chem. Asian J., *in press*.